

# Symposium E-2

計算機シミュレーションによる先端材料の解析・機能創成  
Creation and characterization of advanced materials  
through computer simulation

12月8日(火)  
December 8 (Tue.)

横浜情報文化センター Room A

Yokohama Media & Communications Center, Room A

オーガナイザー:

代表オーガナイザー

吉矢 真人(大阪大学)

連絡オーガナイザー

吉矢 真人(大阪大学)

オーガナイザー

Fisher Craig A. J. (ファインセラミックスセンター)

大場 史康(東京工業大学)

上杉 徳照(大阪府立大学)

篠嶋 妥(茨城大学)

小谷 岳生(鳥取大学)

香山 正憲(産業技術総合研究所)

田村 友幸(名古屋工業大学)

Organizers:

Representative

Masato YOSHIYA (Osaka University)

Correspondence

Masato YOSHIYA (Osaka University)

Organizer

Craig A. J. FISHER (Japan Fine Ceramics Center)

Fumiyasu OBA (Tokyo Institute of Technology)

Tokuteru UESUGI (Osaka Prefecture University)

Yasushi SASAJIMA (Ibaraki University)

Takeo KOTANI (Tottori University)

Masanori KOHYAMA (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

Tomoyuki TAMURA (Nagoya Institute of Technology)

午前の部 1

Morning Oral Session Part 1

座長: 田村 友幸(名古屋工業大学)

Chair: Tomoyuki TAMURA (Nagoya Institute of Technology)

9:30-10:10 Invited E2-I8-001

精密電子構造解析に基づく熱電物性の理解と高性能熱電材料の設計指針 / Guiding principles for developing high-performance thermoelectric materials by means of detailed analyses on electronic structure

竹内 恒博(豊田工業大学)

Tsunehiro TAKEUCHI (Toyota Technological Institute)

10:10-10:30 E2-O8-002

第一原理計算による不純物添加のマグネリ相  $Ti_nO_{2n-1}$  の熱電特性への影響評価 / Impacts of Impurities Doped in Magnéli Phases  $Ti_nO_{2n-1}$  on Thermoelectric Properties by *ab initio* Calculations

金山 大祐<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、

<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Daisuke KANAYAMA<sup>1)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>,  
Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Department  
of Adaptive Machine Systems, Osaka University,  
<sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center)

10:30 ~ 10:40 Coffee Break

午前の部 2

Morning Oral Session Part 2

座長: フィッシャー クレイグ(ファインセラミックスセンター)

Chair: Craig FISHER (Japan Fine Ceramics Center)

10:40-11:20 Invited E2-I8-003

原子層材料の第一原理熱電シミュレーション / First principles thermoelectric simulation of 2D atomic layered materials

小鍋 哲(東京理科大学総合研究院)

Satoru KONABE (Research Institute for Science & Technology, Tokyo University of Science)

11:20-11:40 E2-O8-004

複合酸化物の熱膨張率支配因子の解明 / Analysis of Critical Factors in Thermal Expansion coefficient of complex oxides

赤田 悠輔<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup>  
<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、  
<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Yusuke AKADA<sup>1)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>,  
Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Department  
of Adaptive Machine Systems, Osaka University,  
<sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center)

午後の部 1

Afternoon Oral Session Part 1

座長: 大場 史康(東京工業大学)

Chair: Fumiyasu OBA (Tokyo Institute of Technology)

15:20-16:00 Invited E2-I8-005

材料科学分野における統計的機械学習 / Statistical Machine Learning for Materials Science

志賀 元紀<sup>1)</sup>、武藤 俊介<sup>2)</sup>、巽 一蔵<sup>2)</sup>、津田 宏治<sup>3)</sup>  
<sup>1)</sup>岐阜大学工学部、<sup>2)</sup>名古屋大学エコトピア科学研究所、  
<sup>3)</sup>東京大学大学院新領域創成科学研究科)

Motoki SHIGA<sup>1)</sup>, Shunsuke MUTO<sup>2)</sup>,  
Kazuyoshi TATSUMI<sup>2)</sup>, Koji TSUDA<sup>3)</sup> (<sup>1)</sup>Faculty of  
Engineering, Gifu University, <sup>2)</sup>EcoTopia Science  
Institute, Nagoya University, <sup>3)</sup>Graduate School of  
Frontier Sciences, University of Tokyo)

16:00-16:20 E2-O8-006

強相関電子系における物質設計のための第一原理モデル導出 / First-principles-derivation of effective model for material design in strongly correlated system

榊原 寛史(鳥取大学工学部)

Hirofumi SAKAKIBARA (Tottori university)

## 午後の部 2

### Afternoon Oral Session Part 2

座長：藤平 哲也(東京大学)

Chair : Tetsuya TOHEI (The University of Tokyo)

#### 16:20-16:40 E2-08-007

##### Derivation of phase field crystal model from the first-principles

Swastibrata BHATTACHARYYA<sup>1</sup>, Kaoru OHNO<sup>1</sup>, Ryoji SAHARA<sup>2</sup> (<sup>1</sup>Department of Physics, Yokohama National University, <sup>2</sup>National Institute for Materials Science (NIMS))

#### 16:40-17:00 E2-08-008

##### 結晶構造データベース向けのバンドパス決定法 / Automatic Band Diagram Path Determination for Crystal Structure Databases

日沼 洋陽<sup>1</sup>、東後 篤史<sup>2</sup>、林 博之<sup>1</sup>、田中 功<sup>1,2,3</sup>  
(<sup>1</sup>京都大学大学院工学研究科材料工学専攻、<sup>2</sup>京都大学構造材料元素戦略研究拠点、<sup>3</sup>ファインセラミックスセンター)

Yoyo HINUMA<sup>1</sup>, Atsushi TOGO<sup>2</sup>, Hiroyuki HAYASHI<sup>1</sup>, Isao TANAKA<sup>1,2,3</sup>  
(<sup>1</sup>Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, <sup>2</sup>Elements Strategy Initiative for Structural Materials, Kyoto University, <sup>3</sup>Japan Fine Ceramics Center)

#### 17:00-17:20 E2-08-009

##### 線形リッジポテンシャルにおける多体間相互作用 / Many-body interaction of linear ridge potential energy surface

高橋 亮<sup>1</sup>、世古 敦人<sup>1,2</sup>、田中 功<sup>1,2,3</sup> (<sup>1</sup>京都大学大学院工学研究科、<sup>2</sup>京都大学構造材料元素戦略研究拠点、<sup>3</sup>ファインセラミックスセンター)

Akira TAKAHASHI<sup>1</sup>, Atsuto SEKO<sup>1,2</sup>, Isao TANAKA<sup>1,2,3</sup> (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Kyoto University, <sup>2</sup>ESISM, Kyoto University, <sup>3</sup>JFCC)

17:20 ~ 17:30 Coffee Break

## 午後の部 3

### Afternoon Oral Session Part 3

座長：小鍋 哲(東京理科大学)

Chair : Satoru KONABE (Tokyo University of Science)

#### 17:30-17:50 E2-08-010

##### 層状酸化物におけるポリタイプの第一原理計算 / First-Principles Calculations of Layered Oxide Polytypes

フィッシャー クレイグ、小川 貴史、桑原 彰秀、森分 博紀(ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Craig A.J. FISHER, Takafumi OGAWA, Akihide KUWABARA, Hiroki MORIWAKE  
(Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

#### 17:50-18:10 E2-08-011

##### PMT - QSGW 法の応用例と今後の課題 / Applications of PMT-QSGW method, and next steps

小谷 岳生(鳥取大学)

Takao KOTANI (tottori university)

#### 18:10-18:30 E2-08-012

##### 空間的拘束から導かれる平衡状態の巨視的構造の普遍性 / Universality in configurational evolution from complete disorder

弓削 是貴(京都大学大学院工学研究科)

Koretaka YUGE (Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

12月9日(水)

December 9 (Wed.)

横浜市開港記念会館 Room E

Yokohama Port Opening Plaza, Room E

## 午前の部 1

### Morning Oral Session Part 1

座長：弓削 是貴(京都大学)

Chair : Koretaka YUGE (Kyoto University)

#### 9:30-10:10 Invited E2-I9-001

##### モバイル水素による鉄鋼の粒界水素脆性：第一原理計算 / Intergranular cracking of steel induced by mobile hydrogen decohesion: first-principles calculations

山口 正剛、海老原 健一、板倉 充洋(日本原子力研究開発機構システム計算科学センター)

Masatake YAMAGUCHI, Ken-ichi EBIHARA, Mitsuhiro ITAKURA (Center for Computational Science and e-Systems, Japan Atomic Energy Agency)

#### 10:10-10:30 E2-09-002

##### 第一原理計算によるTi-V系合金の水素吸蔵特性解析 / First-principles calculations of the hydrogen storage characteristics of Ti-V alloys

大谷 紀子<sup>1</sup>、桑原 彰秀<sup>1</sup>、小川 貴史<sup>1</sup>、世古 敦人<sup>2</sup>、田中 功<sup>2</sup>、秋葉 悦男<sup>3</sup> (<sup>1</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所、<sup>2</sup>京都大学大学院工学研究科材料工学専攻、<sup>3</sup>九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所)

Noriko OTANI<sup>1</sup>, Akihide KUWABARA<sup>1</sup>, Takafumi OGAWA<sup>1</sup>, Atsuto SEKO<sup>2</sup>, Isao TANAKA<sup>2</sup>, Etsuo AKIBA<sup>3</sup> (<sup>1</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, <sup>2</sup>Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, <sup>3</sup>International Institute for Carbon-Neutral Energy Research, Kyushu University)

10:30 ~ 10:40 Coffee Break

## 午前の部 2

### Morning Oral Session Part 2

座長：山口 正剛(日本原子力研究開発機構)

Chair : Masatake YAMAGUCHI (JAEA)

#### 10:40-11:00 E2-09-003

##### Mg合金の熱力学的安定性及び短距離秩序に関する第一原理計算 / First-principles study on thermodynamic stability for Mg-based alloys revisited by short-range order

田中 亮平、弓削 是貴(京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Ryohei TANAKA, Koretaka YUGE (Department of Materials Science and Engineering, Kyoto university)

**11:00-11:20 E2-09-004**

合金における状態密度の収束の高速化 / Fast convergence of the density of states in alloys

竹内 一仁、田中 亮平、弓削 是貴(京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Kazuhito TAKEUCHI, Ryohei TANAKA, Koretaka YUGE (Kyoto University, Department of Materials Science and Engineering)

**11:20-11:40 E2-09-005**

均一電子ガスにおける電子ホール運動学と励起子形成 / Electron-hole pair kinetics and exciton formation in homogeneous electron gas

小野 頌太(横浜国立大学大学院工学研究院)

Shota ONO (Department of Physics, Graduate School of Engineering, Yokohama National University)

### 午後の部 1

#### Afternoon Oral Session Part 1

座長：小谷 岳生(鳥取大学)

Chair：Takeo KOTANI (Tottori University)

**13:20-14:00 Invited E2-I9-006**

先端半導体デバイス開発における原子論的シミュレーション技術の活用 / Applications of atomistic simulations to development of advanced semiconductor devices

三成 英樹<sup>1)</sup>、Geoffrey Pourtois<sup>2)</sup>、森 伸也<sup>3)</sup>(<sup>1)</sup>ソニー株式会社、<sup>2)</sup>imec vzw, Belgium、<sup>3)</sup>大阪大学大学院工学研究科)

Hideki MINARI<sup>1)</sup>, Geoffrey POURTOIS<sup>2)</sup>, Nobuya MORI<sup>3)</sup>(<sup>1)</sup>Sony Corporation, <sup>2)</sup>imec vzw, Belgium, <sup>3)</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University)

**14:00-14:20 E2-09-008**

How Small Changes in Shape Strongly Affect the Light Confining Properties of Silver Nanocubes and Give Rise to Exotic Optical Properties

Joel HENZIE<sup>1)</sup>(<sup>1)</sup>National Institute for Materials Science (NIMS), <sup>2)</sup>International Center for Materials Nanoarchitectonics (MANA))

**14:20 ~ 14:30 Coffee Break**

### 午後の部 2

#### Afternoon Oral Session Part 2

座長：竹内 恒博(豊田工業大学)

Chair：Tsunehiro TAKEUCHI (Toyota Technological Institute)

**14:30-15:10 Invited E2-I9-009**

Li過剰系正極活物質における界面でのLi拡散現象に関する第一原理計算 / First-Principles Calculations of Li-Ion Diffusion Phenomena at Interfaces of Li-Excess Transition Metal Oxide Cathode Materials

桑原 彰秀<sup>1)</sup>、肖 英紀<sup>2)</sup>、尉 海軍<sup>3)</sup>、栃木 栄太<sup>2)</sup>、柴田 直哉<sup>2)</sup>、工藤 徹一<sup>2)</sup>、周 豪慎<sup>3)</sup>、幾原 雄一<sup>1,2)</sup>(<sup>1)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所、<sup>2)</sup>東京大学、<sup>3)</sup>産業技術総合研究所)

Akihide KUWABARA<sup>1)</sup>, Yeong-gi SO<sup>2)</sup>, Haijun YU<sup>3)</sup>, Eita TOCHIGI<sup>2)</sup>, Naoya SHIBATA<sup>2)</sup>, Tetsuichi KUDO<sup>2)</sup>, Haoshen ZHOU<sup>3)</sup>, Yuichi IKUHARA<sup>1,2)</sup>(<sup>1)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, <sup>2)</sup>The University of Tokyo, <sup>3)</sup>National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

**15:10-15:30 E2-09-010**

第一原理に基づく半導体中点欠陥の高精度予測 / Accurate Predictions of Point Defect Energetics in Semiconductors from First Principles

熊谷 悠<sup>1)</sup>、大場 史康<sup>1,2)</sup>(<sup>1)</sup>東京工業大学元素戦略研究センター、<sup>2)</sup>東京工業大学応用セラミックス研究所)

Yu KUMAGAI<sup>1)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1,2)</sup>(<sup>1)</sup>Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology, <sup>2)</sup>Materials and Structures Laboratory, Tokyo Institute of Technology)

**15:30-15:50 E2-09-011**

Ga添加ZnOへのF添加が電気伝導性と透明性に及ぼす影響 / Influence of F codoping on the electrical conductivity and transparency of Ga doped ZnO

西山 洋子、山本 知之(早稲田大学基幹理工学研究所)

Yoko NISHIYAMA, Tomoyuki YAMAMOTO (Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University)

**15:50 ~ 16:00 Coffee Break**

### 午後の部 3

#### Afternoon Oral Session Part 3

座長：榊原 寛史(鳥取大学)

Chair：Hirofumi SAKAKIBARA (Tottori University)

**16:00-16:20 E2-09-012**

Al-Si合金中の共晶Siを微細化する各添加物における結晶構造の違い / Crystal Structure Difference among Impurities for Refinement of Eutectic Si in Al-Si Alloys

山本 洋介<sup>1)</sup>、尾崎 了太<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup>、柳楽 知也<sup>1)</sup>、安田 秀幸<sup>1,3)</sup>(<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所、<sup>3)</sup>京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Yosuke SUZUKI-YAMAMOTO<sup>1)</sup>, Ryota OZAKI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup>, Tomoya NAGIRA<sup>1)</sup>, Hideyuki YASUDA<sup>1,3)</sup>(<sup>1)</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, <sup>3)</sup>Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

**16:20-16:40 E2-09-013**

一定電束密度下の第一原理計算を用いたウルツァイト型結晶構造酸化物の強誘電性解析 / First-Principles Analysis of Ferroelectricity in Wurtzite Structured ZnO Using the Fixed-D Method

小西 綾子、小川 貴史、Craig A. J. Fisher、桑原 彰秀、  
森分 博紀(ファインセラミックスセンター・ナノ構造  
研究所)

Ayako KONISHI, Takafumi OGAWA, Craig FISHER,  
Akihide KUWABARA, Hiroki MORIWAKE  
(Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center)

#### 午後の部 4

#### Afternoon Oral Session Part 4

座長：桑原 彰秀(ファインセラミックスセンター)  
Chair：Akihide KUWABARA (Japan Fine Ceramics  
Center)

#### 16:40-17:00 E2-09-014

Electronic model for resistive switching in  
nanodevices

Hannes RAEBIGER<sup>1,2)</sup>,  
Antonio CLAUDIO M. PADILHA<sup>1,2)</sup>,  
Alexandre R. ROCHA<sup>3)</sup>, Gustavo M. DALPIAN<sup>1)</sup>  
(<sup>1)</sup>Centro de Ciencias Naturais e Humanas,  
Universidade Federal do ABC, <sup>2)</sup>Department of  
Physics, Yokohama National University, <sup>3)</sup>Instituto de  
Fisica Teorica, Universidade Estadual Paulista)

#### 17:00-17:20 E2-09-015

$\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>における酸素の粒界拡散の第一原理計算  
/ First principles calculation of oxygen grain  
boundary diffusion in  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

藤平 哲也<sup>1)</sup>、渡邊 唯人<sup>1)</sup>、柴田 直哉<sup>1)</sup>、  
幾原 雄一<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>東京大学大学院工学系研究科総合研究機  
構、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Tetsuya TOHEI<sup>1)</sup>, Yuito WATANABE<sup>1)</sup>,  
Naoya SHIBATA<sup>1)</sup>, Yuichi IKUHARA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>The  
University of Tokyo, <sup>2)</sup>Nanostructures Research  
Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

#### 17:20-17:40 E2-09-016

Liイオン二次電池の正極-電解質界面の第一原理計算 /  
First-principles in-situ XAS simulation of chemical  
reaction at cathode-electrolyte interface in Li-ion  
batteries

田村 友幸、小林 亮、尾形 修司(名古屋工業大学)

Tomoyuki TAMURA, Ryo KOBAYASHI,  
Shuji OGATA (Nagoya Institute of Technology)

12月8日(火)  
December 8 (Tue.)  
横浜情報文化センター

Yokohama Media & Communications Center

#### ポスターセッション

#### Poster Session

#### 13:00-15:20 E2-P8-001

第一原理計算を用いたAl-X合金の比抵抗の予測 /  
Prediction of specific electrical resistance in Al-X  
alloys from first-principles calculations

樋口 公計、上杉 徳照、瀧川 順庸、東 健司(大阪  
府立大学大学院工学研究科)

Tomokazu HIGUCHI, Tokuteru UESUGI,  
Yorinobu TAKIGAWA, Kenji HIGASHI (Osaka  
Prefecture University)

#### 13:00-15:20 E2-P8-002

MDシミュレーションによるZr基の金属ガラスの解析  
/ Molecular Dynamics Analyses of Formation and  
Deformation Mechanisms of Zr-based Metallic  
Glasses

佐藤 壮太、小林 亮、田村 友幸、尾形 修司(名古  
屋工業大学)

Sota SATO, Ryo KOBAYASHI, Tomoyuki TAMURA,  
Shuji OGATA (Nagoya Institute of Technology)

#### 13:00-15:20 E2-P8-003

Ti-Nb-X、Ti-Mo-X合金における変態ひずみと相安定  
性の第一原理計算 / First-principles calculations of  
transformation strain and phase stability in Ti-  
Nb-X and Ti-Mo-X alloys.

南 大地、上杉 徳照、瀧川 順庸、東 健司(大阪府  
立大学工学研究科)

Daichi MINAMI, Tokuteru UESUGI,  
Yorinobu TAKIGAWA, Kenji HIGASHI (Graduate  
School of Engineering, Osaka Prefecture University)

#### 13:00-15:20 E2-P8-004

有機無機ペロブスカイト太陽電池に対するX線照射の  
評価 / Evaluation of X-ray Irradiation Effects on  
the Electronic Structure of Organic-Inorganic  
Perovskite Solar Cells

元木 啓介<sup>1,2)</sup>、宮澤 優<sup>2)</sup>、小林 大輔<sup>2)</sup>、  
池上 和志<sup>3)</sup>、宮坂 力<sup>3)</sup>、山本 知之<sup>1)</sup>、廣瀬 和之<sup>2)</sup>  
(<sup>1)</sup>早稲田大学基幹理工学研究科、<sup>2)</sup>宇宙航空研究開発機  
構宇宙科学研究所、<sup>3)</sup>桐蔭横浜大学大学院工学科)

Keisuke MOTOKI<sup>1,2)</sup>, Yu MIYAZAWA<sup>2)</sup>,  
Daisuke KOBAYASHI<sup>2)</sup>, Masashi IKEGAMI<sup>3)</sup>,  
Tutomu MIYASAKA<sup>3)</sup>, Tomoyuki YAMAMOTO<sup>1)</sup>,  
Kazuyuki HIROSE<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>Graduate School of  
Fundamental Science and Engineering, Waseda  
University, <sup>2)</sup>ISAS, JAXA, <sup>3)</sup>Graduate School of  
Engineering, Toin University of Yokohama)

#### 13:00-15:20 E2-P8-005

シリサイドの系統的な熱膨張率の計算 / Systematic  
Calculations of Thermal Expansion of Silicides

石村 亮祐<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大  
学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセ  
ラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Ryosuke ISHIMURA<sup>1)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>,  
Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Department of Adaptive  
Machine Systems, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures  
Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

#### 13:00-15:20 E2-P8-006

第一原理計算によるAl-Mg-Zn-Cu系合金結晶粒界の検  
討 / A Study on Grain Boundary of Al-Mg-Zn-Cu  
Series Alloy by First-Principles Calculation

福田 忠生<sup>1)</sup>、小武内 清貴<sup>1)</sup>、尾崎 公一<sup>1)</sup>、  
那須 雄大<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>岡山県立大学情報工学部、<sup>2)</sup>岡山県立大  
学大学院)

Tadao FUKUTA<sup>1)</sup>, Kiyotaka OBUNAI<sup>1)</sup>,  
Koichi OZAKI<sup>1)</sup>, Yudai NASU<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>Department of  
System Engineering, Okayama Prefectural University,  
<sup>2)</sup>Graduate School of Systems Engineering, Okayama  
Prefectural University)

**13:00-15:20 E2-P8-007**

アルミナ結晶傾角粒界における不純物偏析 / Impurity Segregation on Symmetric Tilt Grain Boundaries in  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

金森 圭央<sup>1</sup>、横井 達矢<sup>1</sup>、吉矢 真人<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Yoshihisa KANAMORI<sup>1</sup>, Tatsuya YOKOI<sup>1</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, <sup>2</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

**13:00-15:20 E2-P8-008**

Sb, LaおよびNb添加BaSnO<sub>3</sub>の電子構造解析 / Electronic structure analysis of Sb, La and Nb-doped BaSnO<sub>3</sub>

平田 誠、山本 知之(早稲田大学基幹理工学研究科)

Makoto HIRATA, Tomoyuki YAMAMOTO (Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University)

**13:00-15:20 E2-P8-009**

時間依存密度汎関数理論による分子動力学シミュレーション / Molecular dynamics simulation using time-dependent density functional theory

ふあむぬ<sup>1</sup>、佐原 亮二<sup>2</sup>、水関 博志<sup>3</sup>、小野 頌太<sup>1</sup>、大野 かおる<sup>1</sup> (<sup>1</sup>横浜国立大学工学府大学院、<sup>2</sup>国立研究開発法人物質・材料研究機構、<sup>3</sup>KIST)

Nu PHAM<sup>1</sup>, Ryoji SAHARA<sup>2</sup>, Hiroshi MIZUSEKI<sup>3</sup>, Shota ONO<sup>1</sup>, Kaoru OHNO<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Yokohama National University, <sup>2</sup>National Institute for Materials Science, <sup>3</sup>Korea Institute of Science and Technology)

**13:00-15:20 E2-P8-010**

第一原理計算による $\beta$ 型Ti-X合金の相安定性と弾性特性における合金遷移元素の影響 / Influence of alloying transition elements on phase stability and elastic property of  $\beta$  Ti-X alloys from first-principles calculations

小谷野 淳史、上杉 徳照、瀧川 順庸、東 健司(大阪府立大学大学院工学研究科)

Atsushi KOYANO, Tokuteru UESUGI, Yorinobu TAKIGAWA, Kenji HIGASHI (Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University)

**13:00-15:20 E2-P8-011**

Density-Functional Tight-Binding Parameters for Simulation of Zirconia

Aulia SUKMA HUTAMA<sup>1</sup>, Balint ARADI<sup>2</sup>, Thomas FRAUENHEIM<sup>2</sup>, Stephan IRLE<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Department of Chemistry and Institute of Transformative Bio-Molecules, Nagoya University, <sup>2</sup>Bremen Centre for Computational Material Science, Universitat Bremen)

**13:00-15:20 E2-P8-012**

CaTiO<sub>3</sub>中Mnイオンの局所環境解析 / Local Environment Analysis of Mn Ions in CaTiO<sub>3</sub>

村井 智哉、山本 知之(早稲田大学基幹理工学研究科)

Tomoya MURAI, Tomoyuki YAMAMOTO (Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University)

**13:00-15:20 E2-P8-013**

第一原理計算とデータ科学の連携による粒界物性研究 / Combination of DFT-calculations and data-science to study properties of grain boundaries

荒川 竜一、田村 友幸、小林 亮、尾形 修司(名古屋工業大学)

Ryuichi ARAKAWA, Tomoyuki TAMURA, Ryo KOBAYASHI, Shuji OGATA (Nagoya Institute of Technology)

**13:00-15:20 E2-P8-014**

添加したイオンの価数とBaBiO<sub>3</sub>の結晶構造の関係 / Relationship between Valence State of Doped Rare-Earth Ions and Crystal Structure of BaBiO<sub>3</sub>

鎌田 暁久、山本 知之(早稲田大学基幹理工学研究科)

Akihisa KAMATA, Tomoyuki YAMAMOTO (Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University)

**13:00-15:20 E2-P8-015**

層状酸化物熱電変換材料の熱力学的安定性 / Thermodynamic Stability of Layered Oxide Thermoelectrics

中垣 大樹<sup>1</sup>、金山 大祐<sup>1</sup>、藤井 進<sup>1</sup>、吉矢 真人<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Daiki NAKAGAKI<sup>1</sup>, Daisuke KANAYAMA<sup>1</sup>, Susumu FUJII<sup>1</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, <sup>2</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

**13:00-15:20 E2-P8-016**

2H + CO → H<sub>2</sub>CO の第一原理的計算による研究 / 2H + CO → H<sub>2</sub>CO studied by *ab initio* calculation

桑畑 和明、小野 頌太、大野 かおる(横浜国立大学工学府)

Kazuaki KUWAHATA, Shota ONO, Kaoru OHNO (Graduate School of Engineering, Yokohama National University)

**13:00-15:20 E2-P8-017**

Mg<sub>2</sub>Si中のSi析出過程のフェーズフィールドシミュレーション / Phase field simulation of precipitation process of Si in Mg<sub>2</sub>Si

劉 濱<sup>1</sup>、篠嶋 妥<sup>2</sup>、池田 輝之<sup>2</sup> (<sup>1</sup>茨城大学理工学研究科物質科学専攻、<sup>2</sup>茨城大学 工学部 マテリアル工学科)

Bin LIU<sup>1</sup>, Yasushi SASAJIMA<sup>2</sup>, Teruyuki IKEDA<sup>2</sup> (<sup>1</sup>Graduate School of Science and Engineering, Ibaraki University, <sup>2</sup>Department of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering, Ibaraki University)

**13:00-15:20 E2-P8-018**

希ガス原子の van der Waals 相互作用の第一原理計算 / A first-principles calculation of van der Waals interaction between rare-gas atoms

正地 徹<sup>1</sup>、桑原 理一<sup>2</sup>、小野 頌太<sup>1</sup>、大野 かおる<sup>1</sup> (<sup>1</sup>横浜国立大学大学院工学研究科、<sup>2</sup>ダッソー・システムズ株式会社)

Toru SHOJI<sup>1)</sup>, Riichi KUWAHARA<sup>2)</sup>, Shota ONO<sup>1)</sup>,  
Kaoru OHNO<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>Department of Physics Graduate  
School of Engineering, Yokohama National University,  
<sup>2)</sup>Dassault Systemés Biovia K.K.)

**13:00-15:20 E2-P8-019**

アルカリ土類元素添加RECoO<sub>3</sub> (RE = La, Pr, Nd)  
の電子状態解析 / Electronic structure analysis of  
alkaline-earth-doped RECoO<sub>3</sub> (RE = La, Pr, Nd)  
増田 晃一、山本 知之(早稲田大学基幹理工学研究科)

Koichi MASUDA, Tomoyuki YAMAMOTO (Graduate  
School of Fundamental Science and Engineering,  
Waseda University)

**13:00-15:20 E2-P8-020**

第一原理計算によるLn<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>の熱力学的安定相の解  
析 / *ab initio* calculations of thermodynamic phase  
stability of Ln<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>

井沖 新<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>ファインセ  
ラミックスセンター・ナノ構造研究所、<sup>2)</sup>大阪大学大学  
院工学研究科知能・機能創成工学専攻)

Arata IOKI<sup>1)</sup>, Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1)</sup>  
(<sup>1)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center, <sup>2)</sup>Department of Adaptive Machine  
Systems, Osaka University)

**13:00-15:20 E2-P8-021**

第一原理計算を用いた全固体Liイオン電池の界面の研  
究 / First-principles study of interfaces in all solid  
Li-ion battery

伊藤 匡平、田村 友幸、小林 亮、尾形 修司(名古  
屋工業大学)

Kyohei ITO, Tomoyuki TAMURA, Ryo KOBAYASHI,  
Shuji OGATA (Nagoya Institute of Technology)

**13:00-15:20 E2-P8-022**

LaM<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub> (M = Al, Ga, In)における結晶構造解析 /  
Crystal structure analysis of LaM<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub> (M = Ga,  
Al, In)

長田 豊、山本 知之(早稲田大学基幹理工学研究科)

Yutaka OSADA, Tomoyuki YAMAMOTO (Graduate  
School of Fundamental Science and Engineering,  
Waseda University)